

Multiphysik-Ansätze in der Biologie

OTTO RICHTER, MONA RICHTER, NGUYEN HOANG ANH,
MERIMEE YANKE UND JANIN RUMMLAND

Institut für Geoökologie der TU Braunschweig
Langer Kamp 19 c, D-38106 Braunschweig

Zusammenfassung

Unter Multiphysik versteht man ursprünglich die gleichzeitige und gekoppelte Anwendung unterschiedlicher physikalischer Prozessmodelle. Multiphysik-Ansätze werden typischerweise durch Systeme von gekoppelten partiellen Differentialgleichungen modelliert, die durch Finite Element Methoden gelöst werden. Solche Ansätze sind nicht auf die Physik beschränkt. Eine verallgemeinerte Definition umfasst die Kombination von Prozessmodellen aus unterschiedlichen Disziplinen und unterschiedlicher mathematischer Strukturen in einer Anwendung. Dieser erweiterte Ansatz ist insbesondere für die Modellbildung in der Biologie geeignet, da hier grundsätzlich unterschiedlichen Disziplinen zugeordnete Prozesse verschränkt ablaufen. Das wird an vier Beispielen demonstriert: Modelle für den Bioreaktor Boden, in dem sich mikrobielle und physikalische Prozesse gegenseitig beeinflussen, für den Stofftransport im System Boden-Pflanze, für die Populationsdynamik von Schädlingen und ihre Interaktion mit Kulturpflanzen und für die Resistenzausbreitung von Unkräutern, in der populationsdynamische, genetische und physikalische Submodelle unterschiedlicher mathematischer Strukturen zusammen wirken.

1. Einführung

Unter "Multiphysik" versteht man traditionell die simultane und gekoppelte Anwendung unterschiedlicher physikalischer Prozessmodelle. Multiphysik-Ansätze sind motiviert durch die mathematische Modellierung komplexer Systeme, bei denen Prozesse unterschiedlicher "Physiken" miteinander verzahnt ablaufen und sich nicht separat behandeln lassen. Eine typische Anwendung ersieht man aus dem folgenden Vortragsthema einer Multiphysics Conference: Acoustic-Structure Interaction Modeling of Piezoelectric Transducer in Fluid Medium (Acosta et

* Der Vortrag wurde am 11.10.2013 vor der Plenarversammlung der Braunschweigischen Wissenschaftlichen Gesellschaft gehalten.

al. 2012). Der Vortrag behandelt das Zusammenwirken einer Vielzahl physikalischer Teildisziplinen: Akustik, Mechanik, Elektrodynamik, Festkörperphysik und Fluidodynamik. Als weiteres Beispiel wird der Stofftransport einer reaktiven Substanz in einem porösen Medium, wie es der Boden darstellt betrachtet. Hier laufen folgende Prozesse simultan ab: Wassertransport, Stofftransport, Sorption und Desorption an die Bodenmatrix, chemische Umwandlung und Wärmetransport. Zur Beschreibung dieses Systems benötigt man das Geschwindigkeitsfeld des Wassers gekoppelt mit einer Transportgleichung, eine temperaturabhängige chemische Reaktionskinetik, eine Wärmetransportgleichung und eine Kinetik für die Sorption und Desorption. Der Modellansatz besteht typischerweise aus einem System gekoppelter partieller Differentialgleichungen mit Reaktionstermen. Der Begriff Multiphysik hat jedoch in den letzten Jahren eine Erweiterung erfahren und beschränkt sich nicht mehr auf rein physikalische Prozesse. In einem erweiterten Sinne versteht man unter Multiphysik die Kombination von Prozessmodellen aus unterschiedlichen Disziplinen und/ oder die Kombination von Prozessmodellen unterschiedlicher mathematischer Strukturen in einer Anwendung. Multiphysik-Ansätze haben breite Anwendungsfelder in Bereichen wie Mechatronik, Maschinenbau, erneuerbare Energien, Geophysik und Geochemie, Umwelttechnik, Biologie und Medizintechnik eröffnet. Ein besonders reizvolles Anwendungsgebiet ist die Biologie, da hier die Mathematisierung erst seit einigen Jahrzehnten intensiv eingesetzt und diverse mathematische Strukturen und Ansätze hervorgebracht hat, teils in Anlehnung an die Modellbildung in der Physik aber auch eigenständig von der Biologie selbst begründet. Im Folgenden werden vier Anwendungen von Multiphysik-Ansätzen in der Biologie behandelt, die unterschiedliche Ansätze und ihre Kopplung zeigen. In der ersten Anwendung wird der Boden als ein Bioreaktor modelliert, in dem physikalische reaktive Transportprozesse mit der Dynamik von Biofilmen gekoppelt sind. Dabei beeinflussen die Biofilme durch die Änderung der Porengeometrie das Transportverhalten, andererseits wird ihre Dynamik vom Nährstofftransport bestimmt. Der Modellansatz ist aus einem Guss: sämtliche Prozesse werden durch partielle Differentialgleichungen beschrieben. Dies ist auch der Fall in der zweiten Anwendung: Hier wird der Wasser- und Stofftransport in einem Baum durch einen physikalischen Kontinuumsansatz beruhend auf dem hydraulischen Potential beschrieben, wobei die Regulation der Transpiration durch das Blätterdach von einem biologischen Teilmodell beschrieben wird. In der dritten Anwendung wird ein hybrider Ansatz vorgestellt, in dem ein zeitdiskretes populationsdynamisches Modell für einen Schädling mit mehreren Entwicklungsstadien mit einem zeitkontinuierlichen Modell für das Wachstum einer Baumwollkultur gekoppelt wird. Im letzten Beispiel wird die Entwicklung herbizidresistenter Biotypen von Unkräutern und ihre räumliche Ausbreitung behandelt, wobei sowohl physikalische Prozesse (Ausbreitung von Pollen und Samen) und genetische Prozesse durch stochastische und deterministische Modelle gekoppelt werden. Dieser Artikel soll eine Vorstellung über die Vielfältigkeit von Multiphysik-Ansätzen in der Biologie vermitteln. Dabei kann auf

die Modellgleichungen nicht im Detail eingegangen werden. Die grundlegenden Ansätze werden jedoch in Kästen dargestellt um so dem Leser einen Einblick in die mathematischen Strukturen zu geben.

2. Der Boden als Bioreaktor

Das folgende Modell wurde entwickelt um den mikrobiellen Abbau von organischen Substanzen im Boden auf der Porenskala zu beschreiben. Mikroorganismen kommen im Boden in Suspension mit dem Bodenwasser oder als Biofilme innerhalb und außerhalb von Bodenaggregaten vor (Ranjard und Richaume, 2001). Biofilme sind Bakterienpopulationen, die von einer Matrix aus Extrazellulären Polymeren Substanzen (EPS) umschlossen sind (Costerton, 1995).

Durch ihr Wachstum verändern Biofilme den Porenraum des Bodens und können so ganze Poren verstopfen (Kim et al., 2010). Sie stellen so Fließwiderstände für das Bodenwasser dar, was im Modell durch eine Veränderung der Viskosität proportional zur Biofilmdichte ausgedrückt wird. Andererseits können Teile von Biofilmen durch hohe Wasserfließgeschwindigkeiten abgerissen werden (Park et al., 2011). Die organischen Substanzen werden sowohl mit Hilfe des Fließgeschwindigkeitsfeldes des Bodenwassers als auch durch molekulare Diffusion transportiert, wobei sich die Diffusionskonstante je nach Medium, Biofilm oder Wasser, ändert (Wey et al., 2012, Wood und Whitaker, 2000). Bodenpartikel können die organischen Substanzen adsorbieren. Der Abbau der Substanz durch die Mikroorganismen wird im Modell durch eine Monod-Kinetik beschrieben.

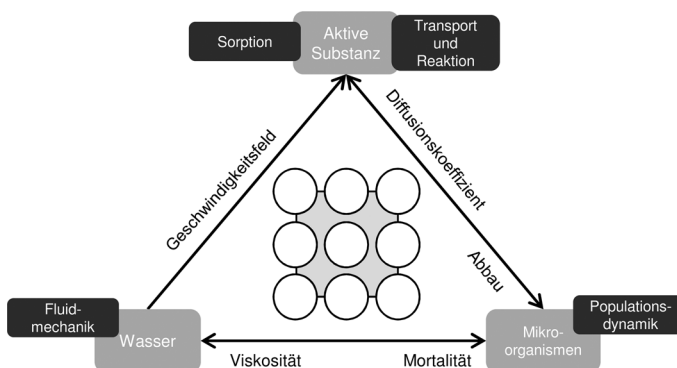
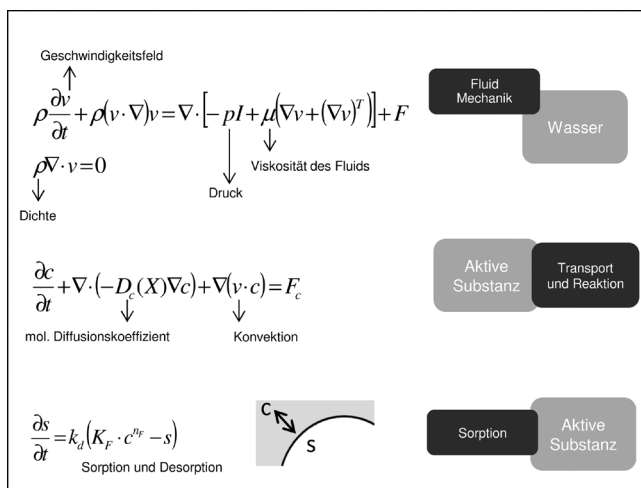


Abb. 2.1. Modelldreieck bestehend aus seinen Komponenten (graue Kästen) und den dazugehörigen Prozessen (schwarze Kästen) und Abhängigkeiten (Pfeile). Modellgeometrie bestehend aus Bodenkörnern (weiße Kreise) und dem Porenraum (grauer Zwischenraum).

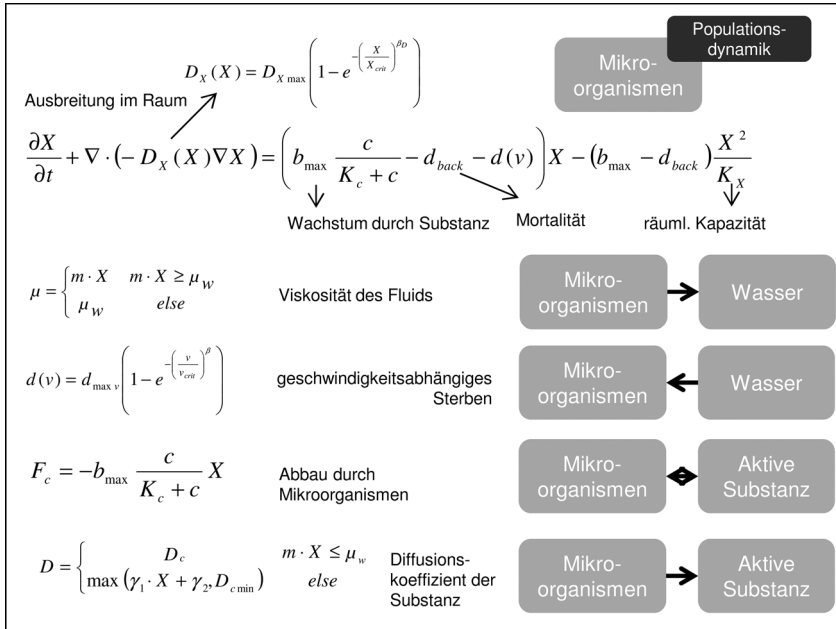


Kasten 2.1. Modellgleichungen für die drei Modellkomponenten Wasser und Substanz. Die Navier-Stokes Gleichungen für den Wassertransport werden mit der Konvektions-Diffusionsgleichung für den Stofftransport gekoppelt. Die Sorptionsgleichung, die nur auf den Partikelrändern gelöst wird, beschreibt die Sorptionsisotherme nach Freundlich.

Der abgebaute Stoff dient dem Biofilm als Wachstumssubstrat. In der Abb. 2.1 ist das Modelldreieck mit seinen Komponenten, Prozessen und Abhängigkeiten dargestellt. In der Mitte des Dreiecks ist ein Ausschnitt der homogenen Modellgeometrie zu sehen. Die dazugehörigen Gleichungen sind in den Kästen 2.1 und 2.2 zu finden. Alle Gleichungen werden im Porenraum gelöst, bis auf die Sorptionsgleichung. Sie wird auf den Partikelrändern gelöst.

Das Modell wurde für eine Geometrie, die einem homogenen Sand mit einer Korngröße von 0.5 mm und einer Porosität von 0.47 entspricht, in COMSOL Multiphysics 4.3 gelöst. Die Simulationszeit betrug 120 Tage. Die Anfangsverteilungen des Biofilms (Abb. 2.2, links) und der organischen Substanz waren ebenfalls homogen. Das System wurde als Durchflussreaktor implementiert, d.h. der Fluss aus dem System ist gleich dem Fluss in das System. Der Biofilm kann in den Zonen geringer Geschwindigkeiten an Dichte zunehmen, aber wird in den Fließwegen des Wassers abgerissen (Abb. 2.2, rechts).

Die Abbildung 2.3 stellt den zeitlichen Verlauf der mittleren Geschwindigkeit, der Substanzkonzentration und der Biofilmdichte im System dar. Am Verlauf der mittleren Geschwindigkeit lassen sich die Interaktionen vom Biofilm und vom Wasser ablesen. Die ersten 40 Tage sind durch steigende mittlere Geschwindigkeiten und damit durch einen sterbenden Biofilm gekennzeichnet. Die mittlere Biofilmdichte allerdings spiegelt dieses Bild nur in den ersten 20 Tagen wieder,



Kasten 2.2. Modellgleichungen für die Mikroorganismen und die Wechselwirkungen mit dem Wasser und der Substanz. Die Populationsdynamik beruht auf einer Reaktions-Diffusionsgleichung mit logistischem Wachstum.

was am deutlichen Wachstum in den Zonen geringer Geschwindigkeiten liegt (Abb. 2.2, rechts).

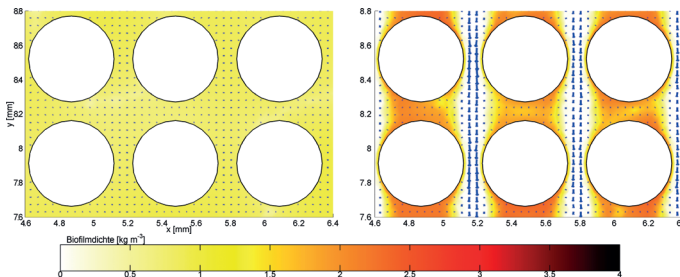


Abb. 2.2. Anfangsverteilung der Biofilmverteilung (links) und die Verteilung nach 30 Tagen (rechts). Die blauen Pfeile stellen das Geschwindigkeitsfeld dar.

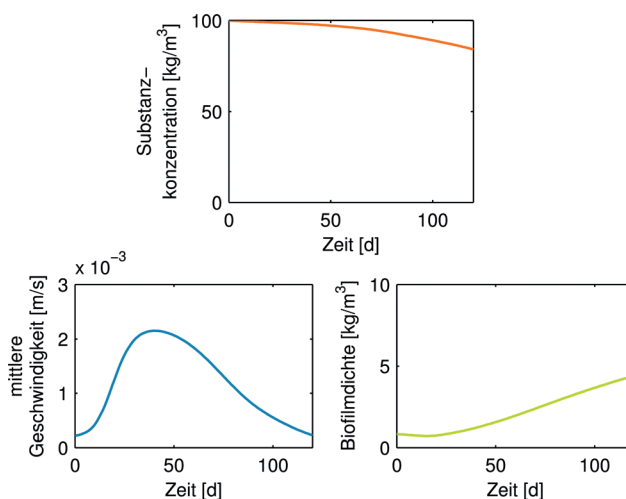


Abb. 2.3. Zeitlicher Verlauf der drei Modellkomponenten Biofilm, Substanz und Wasser im gesamten Gebiet.

3. Stofftransport im System Boden-Pflanze

Das folgende Modell wurde entwickelt, um das Remediationspotential von Mangroven in stark belasteten Ästuaren (Pahalawattarachi et al. 2009) abzuschätzen. Die hier vorgestellte Version ist ein Prototyp und benötigt noch spezifische Parameter für ausgesuchte Schadstoffe. Der mathematische Ansatz für den Stofftransport im System Boden-Pflanze beruht auf der Kohäsions-Wasserspannungstheorie (Cohesion-Tension Theory). Die Potentialdifferenz zwischen Wurzel und Atmosphäre erzeugt eine Saugspannung, die durch die Kohäsion der Wassermoleküle im Xylem den Transpirationsstrom treibt. Physikalische und biologische Prozesse sind hier eng verknüpft: Der Transport ist ein physikalischer Prozess, der im Rahmen der Wassertransporttheorie in porösen Medien beschrieben werden kann, während die Transpiration durch die Blätter ein komplizierter biologischer Prozess ist, der durch Umweltvariablen und das Wasserpotential in der Pflanze gesteuert wird (Janott et al. 2011, Richter et al. 2013). Abbildung 3.1 zeigt das konzeptuelle Modell mit den Bezeichnungen der Zustandsvariablen. Das System wird in Kompartimente aufgeteilt, die durch den Austausch von Wasser und in Wasser gelösten Substanzen in Verbindung stehen. Kasten 3.1 zeigt die Modellgleichungen für den Wasser- und Stofftransport, Kasten 3.2 zeigt das Teilmodell für die Regulation der Transpiration. Die Transpirationsrate wird im Wesentlichen durch die stomatäre Leitfähigkeit geregelt, die von den Umweltvariablen Strahlung, Temperatur, Wasserdampfdefizit und vom Wasserstatus des Gewebes abhängt. Die komplizierten Detailprozesse wie z.B. den hydroaktiven Spaltenschluss, der durch

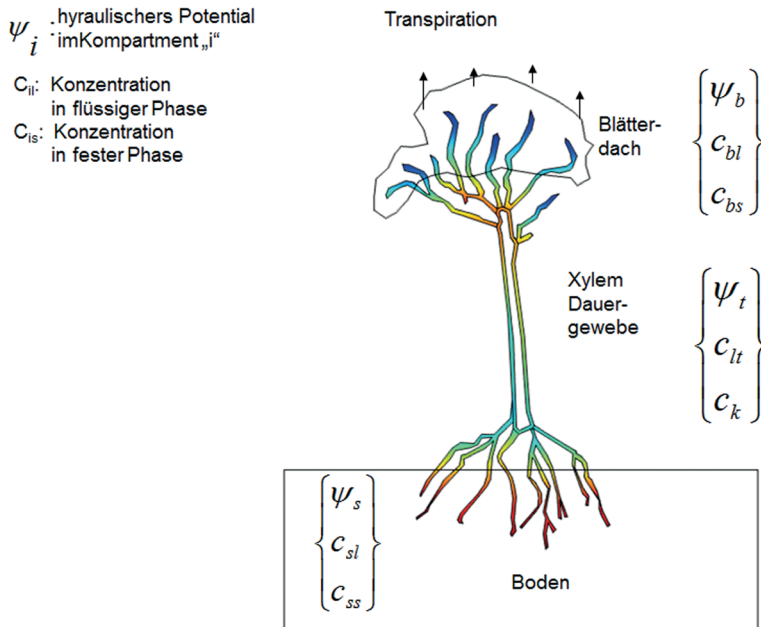


Abb. 3.1. Modellgeometrie und Zustandsvariable für den Wasser- und Stofftransport in einem Baum.

$$C_i(\psi_i) \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = \nabla \cdot K_i(\psi_i) \nabla (\psi_i - z) \quad \text{Wasserpotential im Kompartiment i}$$

\uparrow Kapazitätsfunktion \uparrow Hydraulische Leitfähigkeit \uparrow Gravitationspotential

$$\frac{\partial(\theta c_{li})}{\partial t} = \nabla \cdot (\bar{D} \nabla c_{li} - \vec{q}_i c_{li}) - k_{des} (K_i c_{li} - c_{si})$$

\uparrow Wassergehalt \uparrow Dispersions-tensor \uparrow Konvektion \uparrow Sorption und Desorption Konzentration in flüssiger Phase

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{si} = k_{des} (K_i c_{li} - c_{si})$$

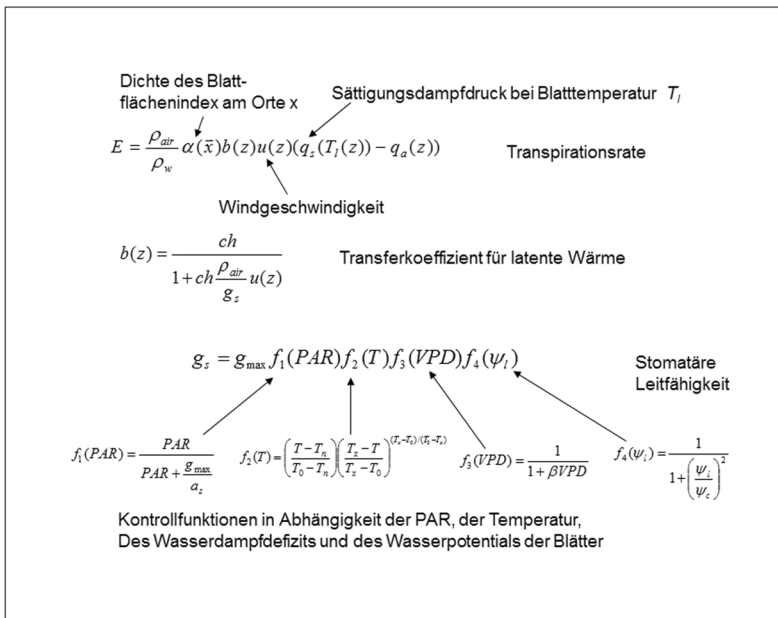
\uparrow Sorption und Desorption Konzentration in fester Phase

$$C_l(\psi_l) \frac{\partial \psi_l}{\partial t} = \nabla \cdot K_l(\psi_l) \nabla (\psi_l - z) - E(v, T, PAR, VPD, \psi_l, \psi_{air})$$

\uparrow Wasserpotential im Blätterdach \uparrow Transpiration

$\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$

Kasten 3.1. Modellgleichungen für den Wasser- und Stofftransport. Sie beruhen auf der Kopplung der Richardsgleichung für den Wassertransport in porösen Medien mit der Konvektions-Dispersionsgleichung.



Kasten 3.2. Teilmodell für die Regelung der Transpiration durch die Umweltvariablen Temperatur, Wasserdampfdefizit, Strahlung, Wasserpotential der Atmosphäre, Wind und das Wasserpotential der Blätter.

das Zusammenwirken vom Abscisinsäure Stoffwechsel und osmotischer Arbeit bewirkt wird, werden dabei durch empirische Responsfunktionen beschrieben.

Das Modell ist vollständig durch gekoppelte partielle Differentialgleichungen mit entsprechenden Randbedingungen darstellbar. Die Anfangs-Randwertprobleme der folgenden Beispiele wurden mit dem Finite Elemente Werkzeug COMSOL

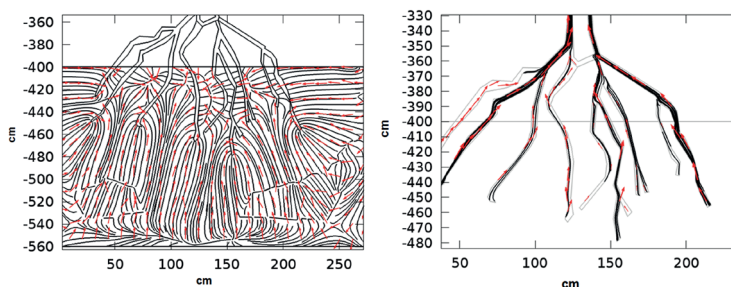


Abb. 3.2. Stromlinienfelder des Wasserflusses im Boden und im Wurzelsystem.

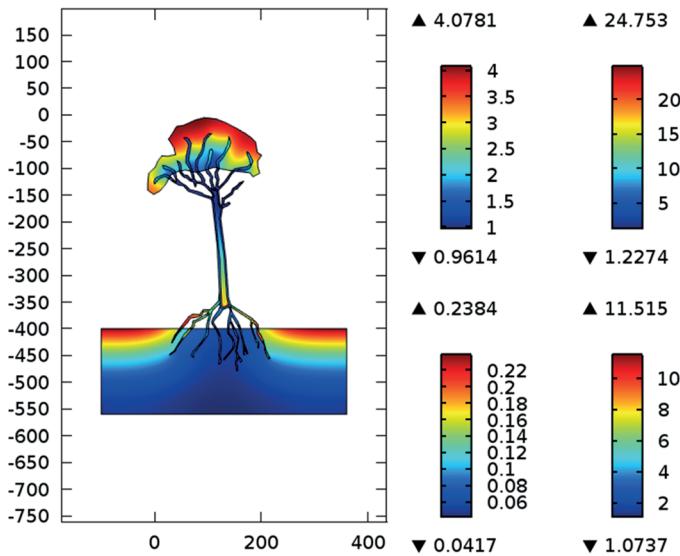


Abb. 3.3. Momentbild der räumlichen Konzentration einer aus dem Boden aufgenommenen Substanz in g/kg. Man beachte, dass die Farbcodierung spezifisch für die Kompartimente ist. Links, oben: Kernholz, rechts oben: Boden, links unten: Blätterdach, rechts unten: Xylem.

Multiphysics gelöst. Die Abbildungen 3.2a und 3.2b zeigen den Verlauf der Stromlinien des Wasserflusses im Boden und in den Wurzeln. Abbildung 3.3 zeigt die räumliche Verteilung einer Substanz im System Boden-Pflanze bei stationärer Zufuhr durch den oberen Rand des Bodens. Abbildung 3.4 zeigt den zeitlichen Verlauf des Blattpotentials unter konstanten Windverhältnissen und bei starker Variation der Windstärke.

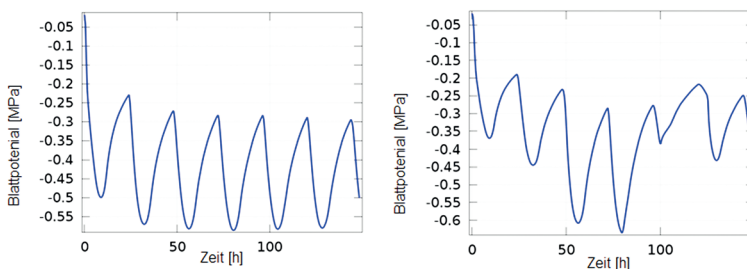


Abb. 3.4. Zeitlicher Verlauf des Blattpotentials an einem festen Punkt bei gleichförmiger Windstärke (links) und bei starker Variation der Windstärke (rechts).

4. Interaktion von Schädlingen und Kulturpflanzen

Das folgende Modell wurde entwickelt, um Managementverfahren bei der Bekämpfung des Baumwollschädling *Helocoverpa armigera* zu optimieren. Abbildung 4.1 zeigt das konzeptuelle Modell.

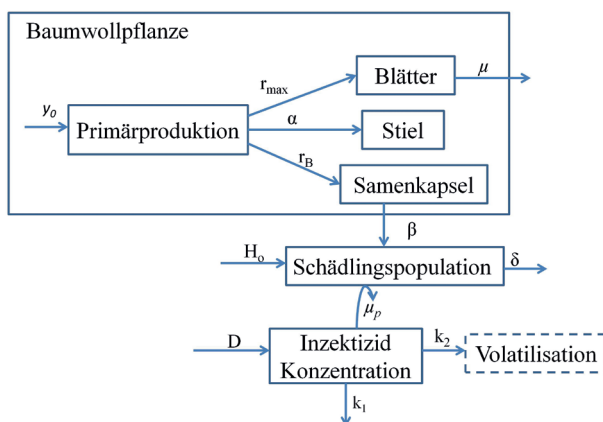


Abb. 4.1. Konzeptuelles Modell für das System Kulturpflanze-Schädling. Das Wachstumsmodell für die Kulturpflanze (Kasten) wird durch ein Differentialgleichungssystem modelliert, ebenso das zeitliche Verhalten des Pestizids. Die Schädlingspopulation wird durch ein zeitdiskretes Modell dargestellt (s. Abb. 4.2).

In dieser Anwendung werden unterschiedliche mathematische Ansätze verwendet: ein zeitkontinuierliches Modell in Form eines Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen für das Wachstum einer Baumwollpflanze und für die Kinetik eines Insektizids und ein zeitdiskretes Modell für die Populationsdynamik einer alters- und stadienstrukturierten Population. Die Dynamik wird durch eine Projektionsmatrix induziert, die aus dem Lebenszyklusgraphen des Schädling (s. Abb. 4.2) abgeleitet wird (Söndgerath et al. 1990, Richter 2005). Die Matricelemente stellen Überlebenswahrscheinlichkeiten in den Altersklassen, Übergangswahrscheinlichkeiten für die Stadien, Schlupfwahrscheinlichkeiten und die Anzahl der Eier pro adultem Tier dar. Um beide Modellansätze zu integrieren, wird das Differentialgleichungssystem für das Wachstum der Kulturpflanze für sukzessive Anfangswertprobleme gelöst, wobei der Zeittakt durch die Zeiteinheit des diskreten populationsdynamischen Modells vorgegeben wird. Am Ende eines Zeitintervalls wird der aktuelle Wert für die Larvendichte in das Differentialgleichungsmodell eingesetzt und das Anfangswertproblem für das nächste Zeitintervall formuliert. Kasten 4.1 zeigt die Modellgleichungen. Die diskrete Dynamik der Schädlinge wird durch sukzessive Formulierung von Anfangswertproblemen für

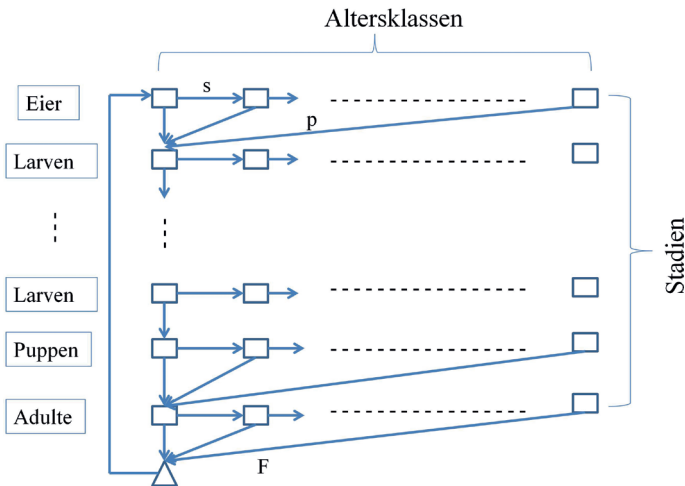
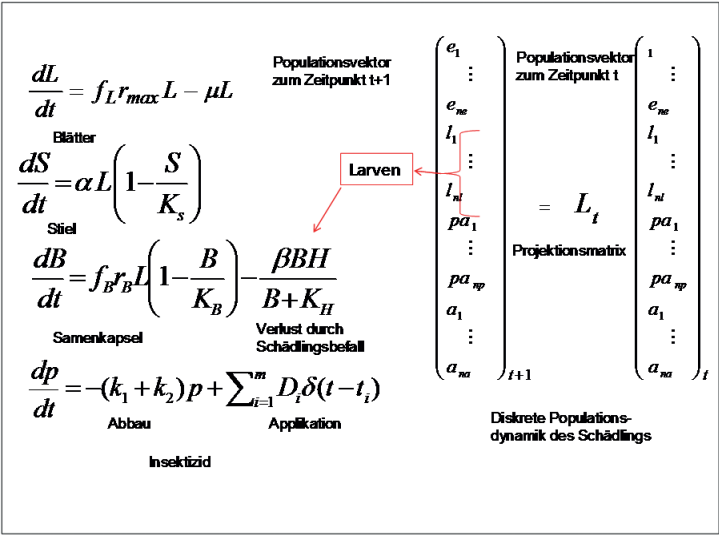


Abb. 4.2. Lebenszyklusgraf einer alters- und stadienstrukturierten Population. Die Knoten des Grafen stellen die Zustände dar und werden durch Überlebenswahrscheinlichkeiten (s), Übergangswahrscheinlichkeiten (p) und Fertilitätskoeffizienten miteinander verknüpft.



Kasten 4.1. Hybride Modellstruktur für die Interaktion Kulturpflanze-Schädling. Das Wachstum der Kulturpflanze mit den Organen Blatt, Stiel und Samenkapsel wird durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben, ebenso die Kinetik eines Insektizids. Die Dynamik des Schädlings wird durch einen zeitdiskreten Ansatz beschrieben. Die Projektionsmatrix L , abgeleitet aus dem Lebenszyklus, bildet den Populationsvektor zum Zeitpunkt t auf den Populationsvektor zum Zeitpunkt $t+1$ ab.

das stetige Modell im gewählten Zeittakt, z.B. 1 Tag, in das Modell integriert. Abbildung 4.3 zeigt den zeitlichen Verlauf der Stadien der Schädlingpopulation. Bedingt durch eine Anfangsverteilung mit nur einer Altersklasse, entwickeln sich in dem betrachteten Zeitraum drei nicht überlappende Generationen. Der Verlauf der Biomasse der Kapseln unter dem Einfluss des Fraßes der Larven ist in Abb. 4.4 dargestellt.

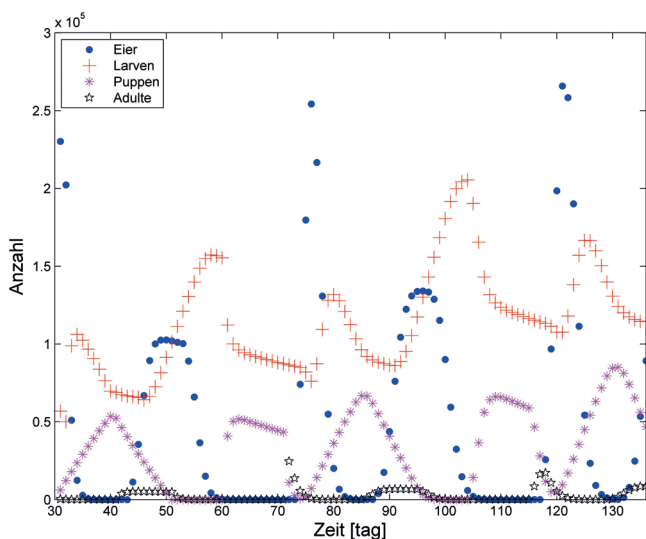


Abb. 4.3. Zeitlicher Verlauf der Stadien der Schädlingpopulation. Da die Dynamik diskret ist, wurden in der Grafik die Punkte nicht verbunden. Die Simulation startet mit einer Alterskohorte (Eier), so dass sich mehrere deutlich getrennte Generationen entwickeln.

5. Resistenzausbreitung

Durch den intensiven Einsatz von Herbiziden in der Landwirtschaft kommt es immer häufiger zur Entwicklung von resistenten Biotypen (Beckie 2006, Powles und Yu 2010, Heap 1997). Die Entwicklung einer monogenetischen Herbizid-resistenz (Target-Site-Resistenz) wird hier mit Hilfe eines individuenbasierten, stochastischen Modells untersucht. In diesem Ansatz wird der Lebensweg von Individuen mittels stochastischer Simulation verfolgt und allgemeine Aussagen werden durch die Statistik über ein genügend großes Ensemble von Einzelschicksalen generiert. Auch diese Methode entstammt der Physik: Sie ist dort unter dem Namen Monte Carlo Simulation bekannt und wurde bereits in den 60iger Jahren im Zusammenhang mit der Simulation von Abbremsprozessen schneller Neutro-

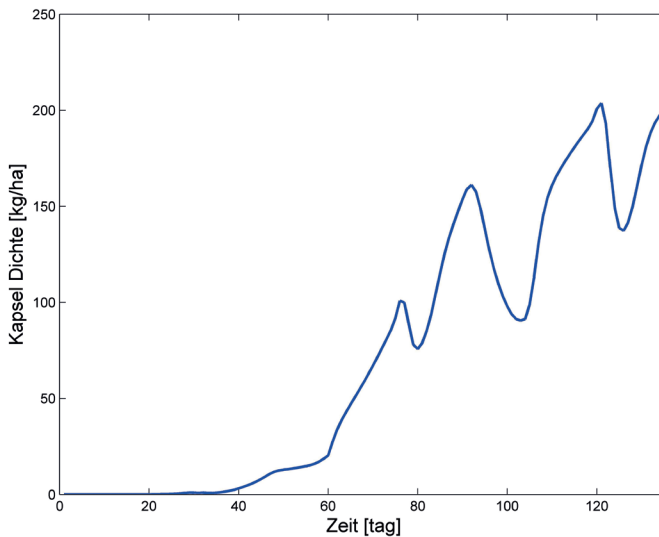


Abb. 4.4. Entwicklung der Biomasse der Kapseln in Wechselwirkung mit der Larvenpopulation. Der Verlust an Biomasse ist korreliert mit der Dynamik der Larven (s. Abb. 4.3).

nen entwickelt. Allerdings sind die Lebensgeschichten von Organismen ungleich komplizierter als die von Elektronen oder Neutronen. Das 1992 von De Angelis und Gross herausgegebene Werk „Individual-Based Models and Approaches in Ecology: Populations, Communities and Ecosystems“ kennzeichnet einen Wendepunkt in der Konzeption von Modellen biologischer Prozesse. Individuenbasierte Modelle werden nicht mehr durch mathematische Gleichungen sondern durch den Programmcode definiert. Es wird kein mathematisches Problem, wie die Lösung eines Anfangswertproblems oder ein Optimierungsproblem, gestellt und gelöst: der Code ist das Modell selbst.

Der hier vorgestellte Modellansatz kombiniert ein

- stochastisches Modell für den Lebenszyklus individueller Pflanzen
- deterministisches Modell für die Ausbreitung von Pollen und Samen
- genetisches Modell.

In einer Pflanzenpopulation können durch natürliche Variabilität Individuen vorkommen, die gegen ein eingesetztes Herbizid resistent sind, d.h. dass das Herbizid keine letale Wirkung mehr hat. Bei der Target-Site Resistenz, auch Wirkortresistenz, kommt es zu einer Veränderung des Rezeptors an dem das Herbizid normalerweise bindet. Die überlebenden Pflanzen geben ihre Erbinformationen an die nächste Generation weiter. Im Falle einer Herbizidresistenz erhöht sich der

Anteil resistenter Individuen in der Population mit jedem weiteren Einsatz des Resistenz verursachenden Herbizides. Um die Resistenzentwicklung in einem Feld zu untersuchen wurden die Lebensstadien eines annuellen Unkrautes in dieses Modell implementiert.

Diese Stadien wurden im Modell wie folgt eingebaut (Abb. 5.1). Das Modell startet mit einer zufälligen Verteilung von Individuen auf einer zuvor bestimmten Fläche. Dafür wird zuerst bestimmt wie viele Pflanzen der drei Biotypen auf der Fläche verteilt werden. Diese drei Biotypen sind homozygot resistent, heterozygot resistent und homozygot sensitiv. Verteilt werden sie indem jeder Pflanze eine zufällige x und y Koordinate zugewiesen wird 5.1 (1)). Diese Pflanzen bilden Pollen und die Ausbreitung der Pollen wird durch einen stochastischen Ausbreitungsprozess modelliert, z.B. durch eine Gaußdichte. Durch Superposition der von den einzelnen Pflanzen erzeugten Pollendichten werden biotypspezifische Pollenkarten erzeugt. Für die Befruchtung wird jetzt jede Pflanze einzeln betrachtet und die über ihr befindliche „Pollenwolke“. Die Pollendichte wird auf 1 normiert. An dem betrachteten Punkt (Pflanzenstandort) wird das Intervall $[0,1]$ gemäß den Anteilen der Pollentypen aufgeteilt. Die Entscheidung mit welchem Pollen die Pflanze befruchtet wird erfolgt dann durch die Position einer in $[0,1]$ gleichverteilten Zufallszahl R (Abbildung 5.1 (2)).

Die befruchteten Pflanzen bilden dann Samen, die genetische Zusammensetzung der Samen ergibt sich aus der Erbinformation der Pflanze und des befruchtenden Pollens. Die Ausbreitung der Samen erfolgt wiederum durch eine Gaußfunktion, hierbei verbleibt der größte Teil der Samen nah an der Pflanze und die Samendichte nimmt mit zunehmender Entfernung schnell ab. Durch Superposition der Samenverteilungen aller Pflanzen erhält man eine Karte der Samendichte (5.1 (3)).

Für die Entscheidung, ob ein Samen keimt, wird die Samenverteilung auf 1 normiert und an einer festgelegten Anzahl an Punkten, die zufällig verteilt sind, wird durch einen zweistufigen Zufallsprozess bestimmt, ob es zur Keimung kommt und wenn ja welchen Biotyp der Keimling besitzt. Der Entscheidungsprozess ist abhängig von den Samendichten der drei Biotypen am betrachteten Punkt. Im ersten Schritt wird eine in $[0,1]$ gleichverteilte Zufallszahl R generiert. Liegt diese unter der normierten Samendichte kommt es zur Keimung. Ähnlich wie bei der Befruchtung wird im 2. Schritt der Biotyp durch einen weiteren Zufallsprozess bestimmt. Dazu wird das Intervall $[0,1]$ gemäß den Anteilen der Biotypen aufgeteilt. Eine weitere Zufallszahl aus $[0,1]$ wird erzeugt und bestimmt gemäß der Aufteilung des Intervalls den Biotyp (Abb. 5.1 (4)). Im nächsten Schritt wird die Überlebenswahrscheinlichkeit der Keimlinge in Abhängigkeit der Wirkstoffmenge bestimmt, wobei die einzelnen Biotypen unterschiedliche Dosis-Wirkungsfunktionen besitzen (Abb. 5.1 (5)). Die überlebenden Pflanzen produzieren dann wieder Pollen, es kommt zur Befruchtung und Samenbildung und die nächste Generation an Keimlingen entsteht. Abbildung 5.2 zeigt die raumzeitliche Dynamik der Keim-

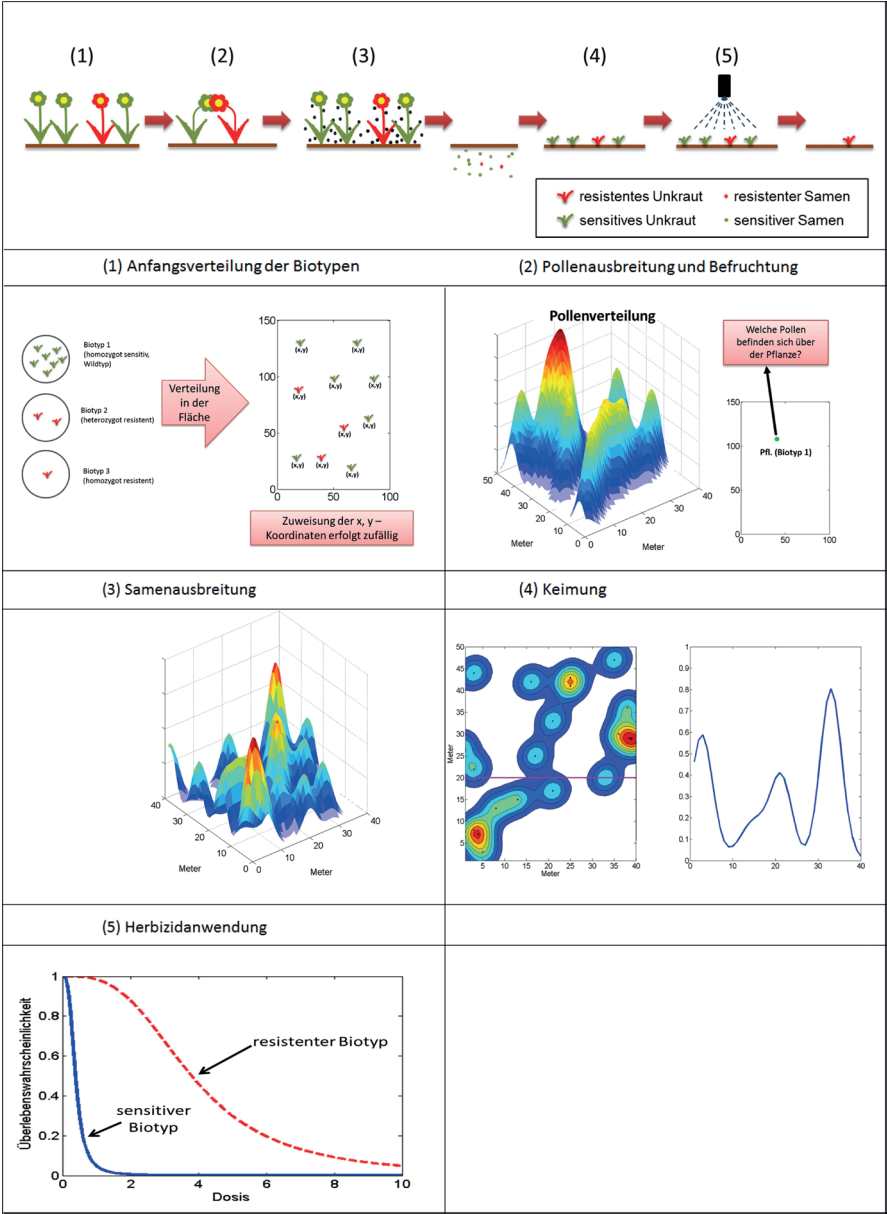


Abb. 5.1. Prozesse des individuenbasierten-stochastischen Modells. 1) Generierung einer Anfangskonfiguration 2) Pollenausbreitung 3) Samenausbreitung 4) Keimung 5) Überleben des Keimlings und Entwicklung zur reifen Pflanze in Abhängigkeit der Wirkstoffmenge eines Herbizids

linge und reifen Pflanzen (die Herbizidapplikation überlebende Pflanzen) über einen Simulationszeitraum von 11 Jahren. Es ist sehr gut zu erkennen wie sich Unkrautnester mit resistenten Pflanzen ausbilden. Diese geklumpten Verteilungen sind typisch für Felder mit Resistenzproblemen.

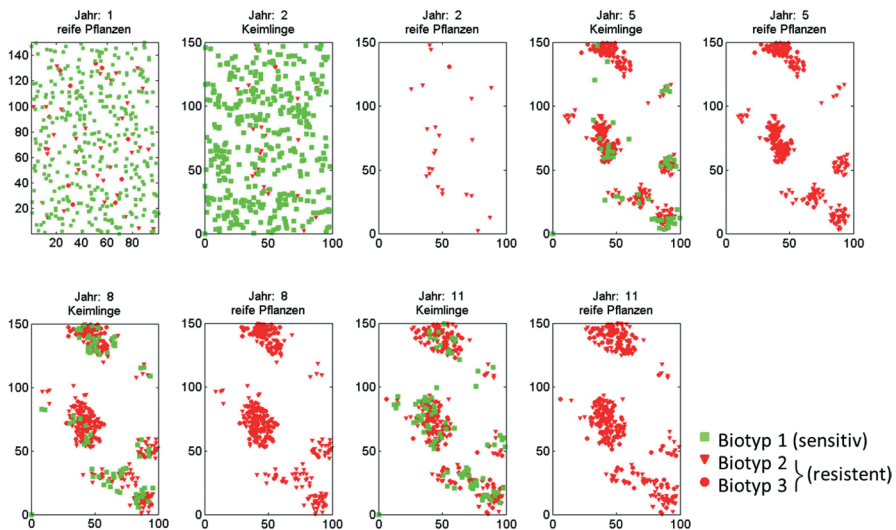


Abb. 5.2. Zeitliche und räumliche Entwicklung einer resistenten Unkrautpopulation auf einem Feld der Dimension 100x150 m. Ausgehend von einer zufälligen Verteilung von Pflanzen mit nur wenigen resistenten Biotypen entwickeln sich unter einer Dauerbehandlung mit einem Herbizid Nester resistenter Pflanzen.

6. Abschließende Bemerkungen

Eine erfolgreiche mathematische Modellbildung in der Biologie erfordert einen intensiven interdisziplinären Dialog zwischen Mathematikern und Biologen, der nicht immer leicht ist. Die Mathematiker müssen in der Lage sein, biologische Prozesse soweit zu verinnerlichen, dass sie diese abstrahieren und mathematisch formulieren können. Sie können nicht erwarten, dass der biologische Partner ihnen ein wohl definiertes mathematisches Problem vorlegt und sie gleich ihr mathematisches Methodenspektrum darauf anwenden können. Sie müssen die mathematischen Aufgabenstellungen unterstützt von ihren Partnern aus der Biologie selbst herausarbeiten. Diese müssen andererseits soweit der mathematischen Sprache mächtig sein, dass sie die Grundstrukturen der Modelle verstehen können. Und sie müssen einsehen, dass Mathematisierung Abstraktion bedeutet, dass nicht

sämtliche Details eines Prozesses nachgebildet werden können und dass man sich über die zeitliche und räumliche Auflösung einigen muss, bevor man an den Entwurf eines ersten noch konzeptuellen Modells geht.

Die obigen Modellansätze verwenden mathematische Methoden auf unterschiedlichem Niveau. Die zeitdiskreten populationsdynamischen Ansätze lassen sich direkt aus biologischen konzeptuellen Modellen z.B. den Lebenszyklusgraphen ableiten. Die räumliche Verteilung von Pollen und Samen wird durch plausible Verteilungsfunktionen vom Gauß-Typ beschrieben. Die Implementierung dieser Ansätze in ein Programm ist einfach und verlangt keine tieferen Kenntnisse in numerischen Verfahren oder der Vektoranalysis. Diese Klasse von Modellen ist gut geeignet für die Anwendung durch Biologen oder für eine Zusammenarbeit von Modellierern mit Biologen, da letztere die Umsetzung der biologischen Prozesse in das Modell leicht nachvollziehen können. Die meisten Modellparameter haben hier eine unmittelbare biologische Bedeutung, so dass selbst beim Fehlen exakter Daten biologisch sinnvolle Intervalle für die Parameter angegeben werden können.

Die Verwendung von gewöhnlichen und partiellen Differentialgleichungen ermöglicht eine hoch aggregierte mathematisch homogene Modellformulierung für Ausbreitungstransport und kontinuierliche populationsdynamische Prozesse. Die Aufstellung und numerische Behandlung von Modellen dieser Klasse setzt vertiefte Kenntnisse der Vektoranalysis und numerischer Methoden voraus. Damit ist klar, dass diese nicht mehr unmittelbar zum interdisziplinären Dialog zwischen Biologen und mathematischen Modellierern geeignet sind.

Ein weiterer Aspekt betrifft die Rolle der Informatik, auf die in dieser Abhandlung nicht eingegangen werden konnte. Unserer Meinung nach ist eine Synthese von Biomathematik und Bioinformatik notwendig, um die Komplexität lebender Systeme erfassen zu können.

Im Vergleich zu der langen Tradition in der Physik hat die Mathematisierung der Biologie gerade erst begonnen und stellt ein faszinierendes Forschungsfeld dar.

Literatur

ACOSTA, V.M., E. RIERA¹, G. RODRIGUEZ, A. PINTO, A. CARDONI & J.A. GALLEGU-JUÁREZ 2012: Acoustic-Structure Interaction Modeling of Piezoelectric Transducer in Fluid Medium, COMSOL Multiphysics Conference, Milano.

BECKIE, H.J. 2006: Herbicide-Resistant Weeds: Management Tactics and Practices. *Weed Technology* **20**: 793–814.

COSTERTON, J.W. 1995: Overview of microbial biofilms, *Journal of Industrial Microbiology*, **15**: 137–140.

DE ANGELIS, D.L. & L.J. GROSS 1992: Individual-Based Models and Approaches in Ecology: Populations, Communities and Ecosystems. Chapman and Hall, New York, NY.

HEAP, I.M. 1997: The Occurrence of Herbicide-Resistant Weeds Worldwide. *Pesticide Science* **51**: 235–243.

JANOTT, M., S. GAYLER, A. GESSLER, M. JAVAUX, C. Klier & M. PRIESACK 2011: A one-dimensional model of water flow in soil-plant systems based on plant architecture. *Plant Soil* **341**: 233–256.

KIM, J.-W., H. CHOI & Y.A. PACHEPSKY 2010: Biofilm morphology as related to the porous media clogging. *Wat. Res.* **44**(4): 1193–1201. doi:10.1016/j.watres.2009.05.049.

PAHALAWATTARACHI, V., C.S. PURUSHOTHAMAN & A. VENNILA 2009: Metal phytoremediation potential of *Rhizophora mucronata* (Lam.). *Indian Journal of Marine Sciences* Vol. **38**(2): 178–183.

PARK, A., H.-H. JEONG, J. LEE, K. KIM & C.S. LEE 2011: Effect of shear stress on the formation of bacterial biofilm in a microfluidic channel. *BioChip Journal* **5**(3): 236–241. doi:10.1007/s13206-011-5307-9.

RANJARD, L. & A. RICHARME 2001: Quantitative and qualitative microscale distribution of bacteria in soil. *Research in Microbiology* **152**(8): 707–716. doi:10.1016/S0923-2508(01)01251-7.

POWLES, S.B. & Q. YU 2010: Evolution in Action: Plants Resistant to Herbicides. *Annual Review of Plant Biology* **61**: 317–349.

RICHTER, O. 2005: Mathematik in der Biologie: Geschichte, Konzepte und Anwendungen. *Abhandlungen der Braunschweiger Wissenschaftlichen Gesellschaft*, Band 54.

RICHTER, O., H.A. NGUYEN & V.P. NGUYEN 2013: Modeling Phytoremediation by Mangroves, Comsol Conference, Rotterdam.

SÖNDGERATH, D. & O. RICHTER 1990: An Extension of the Leslie Matrix Model for Describing Population Dynamics of Species with Several Development Stages. *Biometrics* **46**: 595–607.

WEY, A.S. VAN, A.L. COOKSON, T.K. SOBOLEVA, N.C. ROY, W.C. McNABB, A. BRIDIER, R. BRIANDET & P.R. SHORTEN 2012: Anisotropic nutrient transport in three-dimensional single species bacterial biofilms. *Biotechnol. Bioeng.* **109**(5): 1280–1292. doi:10.1002/bit.24390.

WOOD, B.D. & S. WHITAKER 2000: Multi-species diffusion and reaction in biofilms and cellular media. *Chem. Eng. Sci.* **55**(17): 3397–3418.